

SMART - PFAS

とは何か？



CAR-PFAS
JAPAN

PFAS対策技術コンソーシアム

山下信義

nature communications

PFAS-AI 2025

Global and Historical Use of Novel Contaminants Revealed by Two-Layer Homolog Network and Database Mining

**Zhaoyu Jiao, Sachi Taniyasu, Nanyang Yu, Xuebing Wang,
Nobuyoshi Yamashita, Si Wei**

nature machine intelligence

Pseudodata-based molecular structure generator to reveal unknown chemicals



産総研/南京大学 PFAS-Nature チーム (2017)



Contents lists available at ScienceDirect

Journal of Hazardous Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/jhazmat



SMART-PFAS

機械学習・生成AI・推論エンジン・Open databaseを人類よりも有効に使いこなせるAIによってPFAS適正管理を実現する

Review

Towards **smart PFAS** management: Integrating artificial intelligence in water and wastewater systems

Samaneh Yaghoobian^a, Jinwoo An^b, Dae-Woon Jeong^{c,*}, Jae-Hoon Hwang^{a,*}

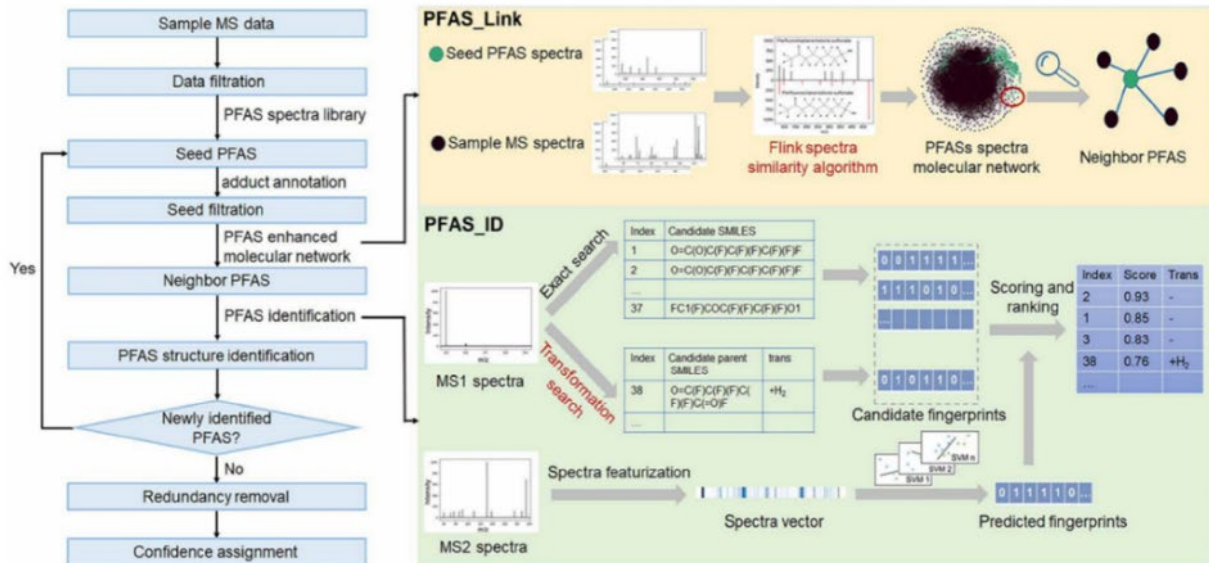
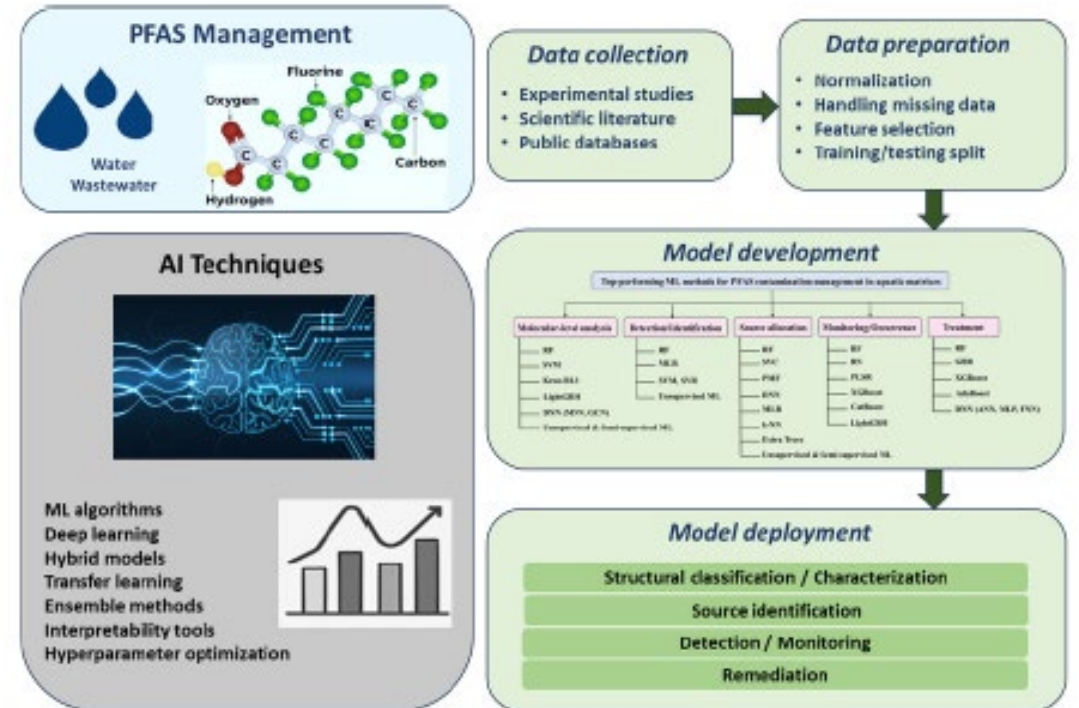
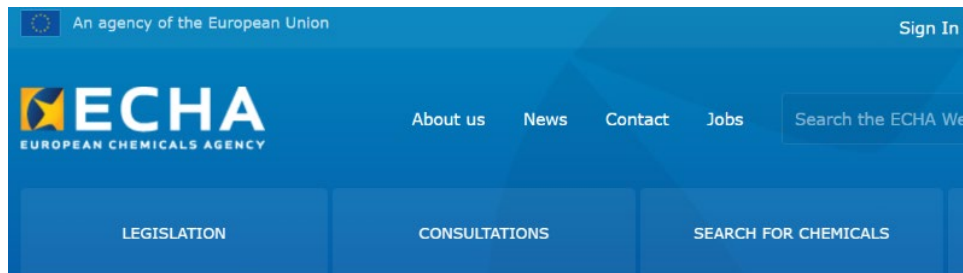


Fig. 2. Overview of the APP-ID workflow for non-target PFAS identification [66].





ECHA > About us > Who we are > Committees and Enforcement Forum > Committee for Risk Assessment

About us

Who we are

- Partners and networks
- Committees and Enforcement Forum
 - Committee for Risk Assessment
 - Members of the RAC
 - Members of the RAC Drinking Water Working Group

Committee for Risk Assessment

The Committee for Risk Assessment (RAC) prepares the opinions of ECHA related to the risks of substances to human health and the environment in the following REACH and CLP processes. The final decisions are taken by the European Commission.

Harmonised Classification and Labelling

RAC examines the proposals for harmonised classification and labelling and gives an opinion on the proposed harmonised classification of substances as carcinogenic, mutagenic, toxic for reproduction or as a respiratory sensitiser, as well as other effects on a case-by-case basis.

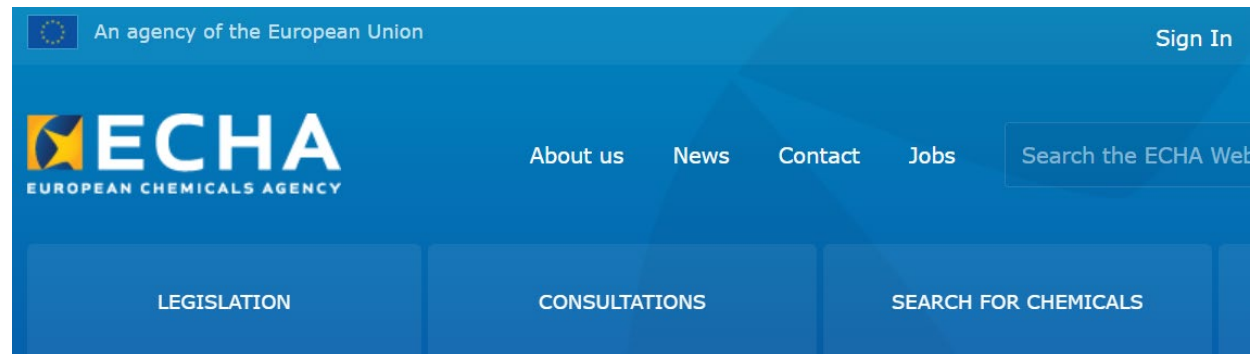
Restriction

The Committee evaluates whether the proposed restriction on manufacture, placing on the market or use of a substance is appropriate in reducing the risk to human health and the environment. This includes the assessment of comments submitted by third parties.

RAC : Committee of Risk Assessment

欧州PFAS規制はリスクアセスメント議論は既に終了、社会経済学的評価に移行している

2026年6月現在「SMART-PFAS」を理解している国内有識者は皆無だが、SEACの基本コンセプトなど、海外ではPFAS循環経済の立案に繋がっている



ECHA > About us > Who we are > Committees and Enforcement Forum > Committee for Socio-Economic Analysis

About us

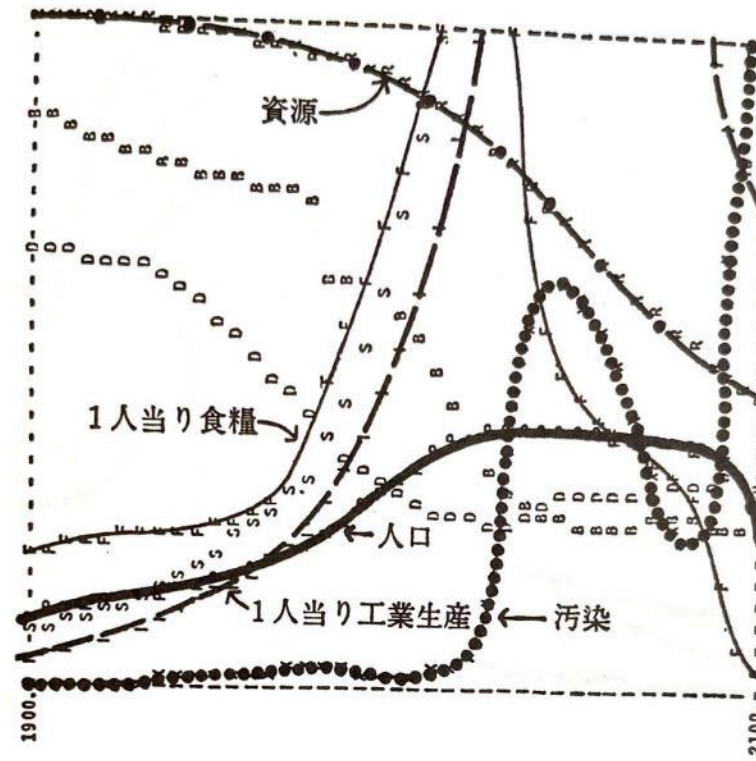
Who we are

- Partners and networks
- Committees and Enforcement Forum

Committee for Socio-Economic Analysis

The Committee for Socio-economic Analysis (SEAC) prepares the opinions of ECHA related to the socio-economic impact of possible legislative actions on chemicals in the following REACH processes. The final decisions are taken by the European Commission.

SEAC : Committee of Socio-Economic Analysis



電子計算機シミュレーション (システムダイナミクス) によって環境経済学を高度化する試みは1972年(54年前)に発表され、最終的にオゾン層回復活動の成功につながった。

ダイヤモンド社

ローマクラブ「人類の危機」レポート

成長の限界

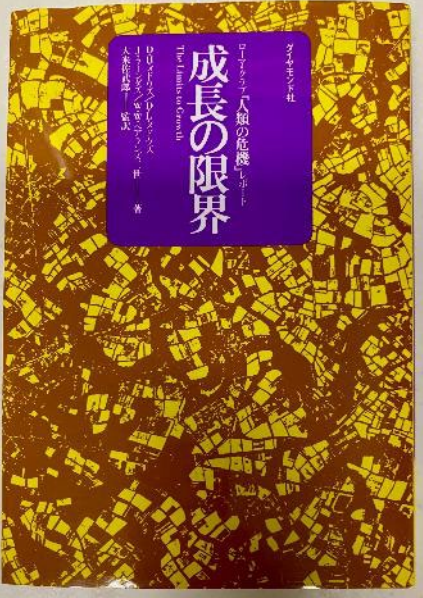
The Limits to Growth

D.H.メドウス/D.レネドウス

J.ライオンダス/W.W.ベアランズ三世

大来佐武郎 監訳

著



ローマクラブが資源と地球の有限性に着目し、MITのデニス・メドウズ他に依頼、システムダイナミクス的手法を使用してとりまとめた研究で、1972年に発表された。

コンピュータを用いた再現手法を用いて、経済と人口増加をモデル化し有限な資源の供給と対照した。

人類だけでは不可能であった「サーキュラーエコノミー」と「持続的発展」は人工知能がシンギュラリティに到達する事で、2025年に初めて実現可能 (SMART-PFAS) となった。

nature communications **PFAS-AI 2025**¹⁷

Global and Historical Use of Novel Contaminants Revealed by Two-Layer Homolog Network and Database Mining

Zhaoyu Jiao, Sachi Taniyasu, Nanyang Yu, Xuebing Wang, Nobuyoshi Yamashita, Si Wei



Artificial Intelligent



Big Data

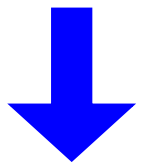


High quality analysis (ISO21675)

個別化合物の測定に依存する化学物質管理の概念を破壊、「未知の化学物質の適正利用」を可能にした。

有害化学物質の地球化学トレーサー研究を40年近く行ってきた産総研の卒業生が2019年に発行した国際標準分析法 ISO21675、人工知能 (AI)と世界中のopen databaseを利用して「全てのPFAS」の測定を可能にした研究で、2025年に発表された。

The 1st step of SMART-PFAS



PFAS-AI (2025)

The 2nd step of SMART-PFAS

**TOYOTA プロジェクト (2026)
(PFAS-AI/WAVEBASE)**

2026年に開始された、国際標準規格活動のISO/TC 147/SC2/WG85 でも Non-target analysis ではなく Non-target screening を目的としている

ノンターゲット分析(NTA/NTS)という用語は、特定の技術・装置を示すのではなく、測定対象を限定せずに試料測定を行い全ての分子イオンを解析する研究アプローチを示す用語に過ぎない

*TOFMS (/MS)と Orbitrap HRMS は全く異なる分析装置だが
いずれも NTA/NTS に使われる*

日本人は *Technology* を盲信するが、*Science* を理解しよう
としないために、その場しのぎの *技術* に飛びつきやすい

過去57年間のPFAS分析化学の歴史を理解しなければ、数多く存在する分析技術を使い分けて「本当に測定すべき情報」に到達できない。

PFAS分析技術の歴史

PFAS対策技術コンソーシアム (2025sept) 禁転載

57年後

PFAS-AI (suspect screening ⇒ prediction analysis)

人工知能を用いる事でTOFMSで得られた巨大スペクトルライブラリーを生成する可能性のあるPFASを特定できる
(= 試料中に存在すれば測れないPFASは無い)

土壌試料

SPE(WAX, GCB+WAX)
PFAS(30種以上)測定
(NARO 2024)
(USEPA Method 1633, 2021) 40種PFAS

大気試料

PFAS測定
passive sampler
(Ahrens, 2013)
デニューダー
(Ahrens, 2011)
CAS (-40°C冷却捕集装置)
(Yu, 2020)
OTM-45/50
(USEPA, 2021/2024)
インパクター + 吸着剤による
ガス・粒子の一斉測定
(Wu, 2021/Yamazaki, 2021)

全大気(ガス・粒子)中

PFASのマスバランス
解析 (Lin 2022)

製品分析

ECHA規制案 (2023)
(PFAS total測定)

水試料(およびSPEで抽出される全ての試料)
PFAS(30種以上)測定

LCMSMS
LCTOFMS
LCHRMS (OrbiTrap)

SPE(WAX)

ISO21675 (2019)
30+9

次期JIS (2027予定)

USEPA Method 533
(2019) 25種PFAS

水試料(およびSPEで抽出される全ての試料)の
マスバランス解析

水試料
PFOS/PFOA測定
(2002/2004)

LCMSMS

SPE(WAX, HLB)

ISO25101 (2009)
PFOS/PFOA

JIS 0450-70-10
(2011) 19種PFAS付属書

USEPA Method 537.1
(2018) 18種PFAS

ヒト血液の
マスバランス解析
(Miyake 2006)

野生動物血液
PFOS/PFOA測定
(1999/2001)

LCシングルMS

イオンペア抽出

ヒト血液
PFOA関連物質検出
(1978)

GC-ECD

トリエチルシリル
誘導体化

ヒト血液
有機フッ素検出
(1968)

フッ素電極法

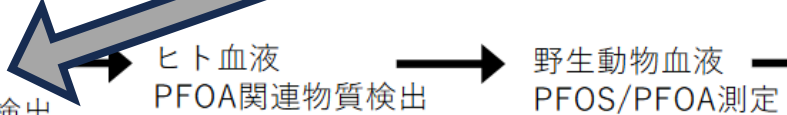
灰化

バルク測定

LCMSMSと
燃焼イオンクロマト
グラフ(CIC)を
併用したマスバ
ランス解析技術

FTIR、IRMS、DART等、原理的にPFASの測定が可能としても「客観的に信頼性が確保されている分析法」以外は除く

個別物質測定



MSMS (ターゲット測定)と HRMS / TOFMS (ノンターゲット測定)の比較

MSMSの測定データは高感度・選択性が高いが装置依存性がある

MSMSの高感度測定のためには標準物質が必須(測定データの外部にもものさし(ライブラリ)が必要)

高度な技術・専門知識を有する専門家でなければ本当の性能は使いこなせない

HRMS/TOFMSの測定データはDIA (SWATH) を用いてもMSMSより感度が低い化合物の取りこぼしは少ない

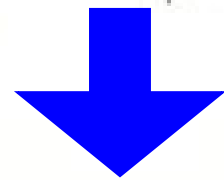
巨大なHRMS/TOFMSデータはそれ自身が質量データベース(ライブラリ)となるため、基本的に標準物質は不要、特にDIAにより質量校正精度が高い

1GB/測定の巨大データの人材でのマニュアル解析は困難であり、メーカーごとに解析プログラムを用意している

様々なメーカーから、NTS/NTA装置が販売されているが、Target analysisと比較すると、測定結果の相互比較性/再現性が低い。

NTS/NTAは化石発掘のように膨大なデータからPFAS情報だけ掘り出す作業が必要であり、その方法はメーカーごと、装置ごと、分析条件ごとに異なる。

10年前に化学物質管理の鍵技術になる事が期待されていた
NTS/NTAはビッグデータ解析技術/
システムティックな利用方法が欠けているために本来の性能が得られていない。



測定結果の相互比較性/再現性を確保するためにはメーカーの垣根を超えた共通プラットフォームが必要



PFAS-AI / WAVEBASE とは

HR-MS(/MS)測定から得られるビッグデータからPFAS情報を発掘するための「**共通プラットフォーム**」を提供する

➡ 装置やメーカーに依存しない測定結果を誰でも実現できる

試料中にOECDのPFAS定義をみたす物質が存在すれば **必ず測定できる**

Open databaseを利用する事で *Anonymous* の限定データでもある程度の測定精度が期待できる (生成AIと推論エンジン)

NATUREに公表したPFAS-AI 2との比較により技術の信頼性を担保できる

➡ ECHA規制案の要求する、PFAS個別測定とPFAS Total測定を代替できるPFAS-AI 測定 (*option 3*)を日本から提案できる

POPRC-21/6 working group

Table 7. Restriction options (ROs) assessed.

Restriction option (RO)	Transition period before RO takes effect	Duration of derogation
RO1: Full ban		Not applicable
		5 years after transition period ends
RO2: Ban with use derogation	18 months	2 years after transition period ends

制限オプション (RO)	移行期間	移行期間終了後の措置
RO1: 完全な禁止	18か月	なし
RO2: 特定用途に猶予がある禁止		移行期間終了後5年
		移行期間終了後12年

ECHA規制は全ての有害物質の含有量を製品に明記する(ラベリング規制)の始まりに過ぎない。

PFASの個別化合物管理ではPFAS totalに対応できない

RO2:
i. 25 ppb for any PFAS as measured with targeted PFAS analysis (polymeric PFASs excluded from quantification)

ii. 250 ppb for the total PFAS measured with prior degradation products (polymeric PFASs excluded from quantification)
 「製造に使っていないから、製品中に含まれていることを知らなかった」では済まない時代のPFAS適正管理・利用を **SMART-PFAS** が可能にする

iii. 50 ppm for PFASs (polymeric PFASs included). If total fluorine is measured as follows, the restriction shall upon request provide to the enforcement authorities a proof for the fluorine measured as follows with SMART-PFAS.

- RO2:
- i. いずれかのPFASの(単体)濃度が25 ppb
 - ii. 測定したPFASの合計濃度が250 ppb (TOP assay等の前駆体分解後の値でも可)
 - iii. ポリマーを含むPFAS総濃度が50 ppm (全フッ素管理では50 mg F/kgを超える)と、該当製品の輸入者又は下流業者に製品中フッ素値の報告が義務づけられる)

This restriction proposal covers all substances defined above as substances on their own, as a constituent (including as impurity or additive) as well as in mixtures and in articles.

上記案は製品材料だけでなく不純物質や添加剤も含むため製品自体のPFAS分析が必須となる

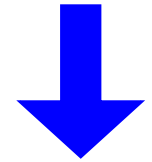
PFAS-AI / WAVEBASE の海外の展開

PFAS対策技術コンソーシアム

欧州共同体PFAS関連政策立案機関への情報提供

ARAGORN, INCITE (Innovation Centre for
Industrial Transformation and Emissions),

ストックホルム条約(POPRC-21/6 WG他)への情報提供



“Science-based Management, Assessment and Remediation
Technologies for PFAS (**SMART-PFAS**) in **Circular Systems**”
(The Knowledge Foundation 2026 - 2031).

ローマクラブ/MIT の「**成長の限界 (1972)**」と同様に、ナレッジファウンデーション/
CAR-PFAS の「**SMART-PFAS (2026)**」により「**PFAS 循環経済**」が初めて実現できる

地政学的視点から見た PFAS 対策技術 の現状と将来展望

規制されていない化学物質は無制限に使用できる国内の考え方は完全に時代遅れであり、日和見主義を続けると最悪、総量規制を海外から強制されるおそれもある。

未知の化学物質(PFAS)の環境/経済影響を予測可能な「SMART-PFAS」によって人工化学物質利用の概念・方法論の再構築が海外で進んでいる。

日本製造業の国際競争力を取り戻すためには、全ての化学物質について環境安全性を予測し、適切な管理利用を行うことが必須であり、そのためには人類よりもビッグデータをうまく利用できる「AIとの共創」が必須である。